## (19)日本国特許庁 (JP)

# (12) 公開特許公報(A)

(11)特許出願公開番号 特開2003-342284 (P2003-342284A)

(43)公開日 平成15年12月3日(2003.12.3)

(51) Int.Cl.7		識別記号		FΙ			テーマ	73~ド(参考)
C07F 1	15/00			C07F	15/00		E	3 K O O 7
C09K 1	11/06	660		C09K	11/06	660	) .	4H050
H05B 3	33/14			H 0 5 B	33/14		В	
				審査請求	未請求	請求項の数8	OL	(全 17 頁)
(21)出願番号		特願2002-15658	36(P2002-156586)	(71)出願		)1007 ノン株式会社		
(22)出願日		平成14年5月30日	∃ (2002. 5. 30)		東京都	都大田区下丸子3	丁目30	番2号
				(72)発明	者 井川	悟史		
						都大田区下丸子 3 朱式会社内	丁目30	番2号 キヤ
				(72)発明		隆雄		
						郡大田区下丸子3 朱式会社内	丁目30	番2号 キヤ
				(74)代理,				
						上 渡辺 敬介	(外1	名)

# 最終頁に続く

# (54) 【発明の名称】 金属配位化合物、発光素子及び表示装置

# (57)【要約】 (修正有)

【課題】 新規な発光材料を提供し、それによって高効率発光で、長い期間高輝度を保ち、長波長化が可能な発光素子及び表示装置を提供する。

【解決手段】 一般式(1)で示されることを特徴とする金属配位化合物。

$$ML_mL'_n$$
 (1)

[式中MはIrまたはPtの金属原子であり、Lおよび L'は互いに異なる二座配位子を示す。mは1または2または3であり、nは0または1または2である。ただ し、m+nは2または3である。部分構造 $ML_n$ は一般式(2)で示され、部分構造 $ML_n$ は一般式(3)または(4)で示される。

X及びX´は、Nを介して金属原子Mに結合した置換基を有していてもよい環状基、YはCを介して金属原子Mに結合した置換基を有していてもよい環状基、Zは置換基を有していてもよい環状基、Aはアルキル基、窒素等、Eは単結合、アルキレン基等、G,G´及びJは水素原子、アルキル基等である。]

#### 【特許請求の範囲】

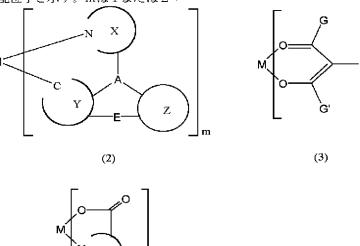
【請求項1】 下記一般式(1)で示されることを特徴 とする金属配位化合物。

1

ML<sub>m</sub>L'<sub>n</sub> (1)

「式中MはIrまたはPtの金属原子であり、Lおよび L'は互いに異なる二座配位子を示す。mは1または2\* \*または3であり、nは0または1または2である。ただ し、m+nは2または3である。部分構造MLaは下記 一般式(2)で示され、部分構造ML'nは下記一般式 (3) または(4) で示される。

#### 【化1】



(4)

NとCは、窒素および炭素原子である。X及びX'は窒 素原子を介して金属原子Mに結合した置換基を有してい てもよい環状基であり、Yは炭素原子を介して金属原子 Mに結合した置換基を有していてもよい環状基であり、 Zは置換基を有していてもよい環状基である。これら環 状基の置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ジ 置換アミノ基 { 該置換基はそれぞれ独立して置換基を有 していてもよいフェニル基、ナフチル基(該置換基はハ ロゲン原子、メチル基またはトリフルオロメチル基また は炭素原子数1から8の直鎖状または分岐状のアルキル 基であり、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置 換されていてもよい。) または炭素原子数1から8の直 鎖状または分岐状のアルキル基であり、該アルキル基中 炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル 基 { 該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上 40 のメチレン基は一〇一、一S一、一〇〇一、一〇〇一〇 ー、一〇一〇〇一、一〇H=CHー、一〇≡〇一で置き 換えられていてもよく、該アルキル基中の1つもしくは 2つ以上のメチレン基は置換基を有していてもよい2価 の芳香環基(該置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニト ロ基、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のア ルキル基(該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2 つ以上のメチレン基は一〇一、一S一、一〇〇一、一〇 O-O-, -O-CO-, -CH=CH-,  $-C\equiv C-$ 

※子はフッ素原子に置換されていてもよい。)を示す。) で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原 子はフッ素原子に置換されていてもよい。 } 、置換基を 有していてもよいアリール基 (該置換基はハロゲン原 子、メチル基またはトリフルオロメチル基または炭素原 子数1から8の直鎖状または分岐状のアルキル基であ り、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換され ていてもよい。) から選ばれる。また、隣接する置換基 は結合して環構造を形成してもよい。XとY、XとZ は、A原子またはA原子団を介した共有結合によって結 合している。Aは、CR、N、B、SiR'であり、 R、R'は、水素原子、置換基を有していてもよいアリ ール基(該置換基はハロゲン原子、メチル基またはトリ フルオロメチル基または炭素原子数1から8の直鎖状ま たは分岐状のアルキル基であり、該アルキル基中の水素 原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)、または 炭素原子数 1 から 2 0 の直鎖状または分岐状のアルキル 基 { 該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上 のメチレン基は一〇一、一S一、一〇〇一、一〇〇一〇 -、-O-CO-、-CH=CH-、-C≡C-で置き 換えられていてもよく、該アルキル基中の1つもしくは 2つ以上のメチレン基は置換基を有していてもよい2価 の芳香環基(該置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニト 口基、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のア ルキル基(該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2 で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原※50 つ以上のメチレン基は-〇-、-S-、-C〇-、-С

O-O-, -O-CO-, -CH=CH-,  $-C\equiv C-$ で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原 子はフッ素原子に置換されていてもよい。)を示す。) で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原 子はフッ素原子に置換されていてもよい。} から選ばれ る。YとZは、E原子またはE原子団を介した共有結合 によって結合している。Eは、単結合または炭素原子数 1から4の直鎖状または分岐状アルキレン基(該アルキ レン基中の1つのメチレン基は-O-、-S-、-CO -, -CO-O-, -O-CO-, -CH=CH-, -C≡Cーで置き換えられていてもよく、該アルキレン基 中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。) から選ばれる。G, G'および」はそれぞれ独立して炭 素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基 {該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上の メチレン基は一〇一、一S一、一C〇一、一C〇一〇 -、-O-CO-、-CH=CH-、-C≡C-で置き 換えられていてもよく、該アルキル基中の1つもしくは 2つ以上のメチレン基は置換基を有していてもよい2価 の芳香環基(該置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニト ロ基、トリアルキルシリル基(該アルキル基はそれぞれ 独立して炭素原子数1から8の直鎖状または分岐状のア ルキル基である。)、炭素原子数1から20の直鎖状ま たは分岐状のアルキル基(該アルキル基中の1つもしく は隣接しない2つ以上のメチレン基は-0-、-S-、 -CO-, -CO-O-, -O-CO-, -CH=CHー、一C≡C一で置き換えられていてもよく、該アルキ ル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよ \* \*い。)を示す。また、隣接する置換基は結合して環構造 を形成してもよい。)で置き換えられていてもよく、該 アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていて して置換基を有していてもよいフェニル基、ナフチル基 (該置換基はハロゲン原子、メチル基またはトリフルオ ロメチル基である。) または炭素原子数1から8の直鎖 状または分岐状のアルキル基であり、該アルキル基中の 水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。 〉、置 換基を有していてもよいアリール基(該置換基はハロゲ ン原子、メチル基またはトリフルオロメチル基または炭 素原子数1から8の直鎖状または分岐状のアルキル基で あり、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換さ れていてもよい。) から選ばれる。また、Jは水素原子 であってもよい。]

【請求項2】 前記一般式(1)においてnが0である ことを特徴とする請求項1に記載の金属配位化合物。

【請求項3】 前記一般式(1)において部分構造M L'nが前記一般式(3)で示されることを特徴とする 請求項1に記載の金属配位化合物。

【請求項4】 前記一般式(1)において部分構造M L'nが前記一般式(4)で示されることを特徴とする 請求項1に記載の金属配位化合物。

【請求項5】 前記一般式(1)において、前記一般式 (2)で示される部分構造MLmが、下記一般式(5) ~(9)から選ばれることを特徴とする請求項1~4の いずれかに記載の金属配位化合物。

【化2】

[環状基は置換基を有してもよく、これらの置換基はハ ロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ジ置換アミノ基 {該 置換基はそれぞれ独立して置換基を有していてもよいフ ェニル基、ナフチル基(該置換基はハロゲン原子、メチ ル基またはトリフルオロメチル基または炭素原子数1か ら8の直鎖状または分岐状のアルキル基であり、該アル キル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよ い。) または炭素原子数1から8の直鎖状または分岐状 のアルキル基であり、該アルキル基中の水素原子はフッ※50

※素原子に置換されていてもよい。 } 、炭素原子数1から 20の直鎖状または分岐状のアルキル基 { 該アルキル基 中の1つもしくは隣接しない2つ以上のメチレン基は一 O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -O-CO ー、一CH=CH-、一C≡C-で置き換えられていて もよく、該アルキル基中の1つもしくは2つ以上のメチ レン基は置換基を有していてもよい2価の芳香環基(該 置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、炭素原子 数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基(該ア

ルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上のメチレ ン基は一〇一、一S一、一〇〇一、一〇〇一〇一、一〇 -CO-、-CH=CH-、-C≡C-で置き換えられ ていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子 に置換されていてもよい。)を示す。)で置き換えられ ていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子 に置換されていてもよい。 と、置換基を有していてもよ いアリール基(該置換基はハロゲン原子、メチル基また はトリフルオロメチル基または炭素原子数1から8の直 鎖状または分岐状のアルキル基であり、該アルキル基中 10 の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)か ら選ばれる。また、隣接する置換基は結合して環構造を 形成してもよい。]

【請求項6】 請求項1~5のいずれかに記載の金属配 位化合物を含む有機化合物層を有することを特徴とする 発光素子。

【請求項7】 前記金属配位化合物を含む有機化合物層 が、対向する2つの電極に狭持され、該電極間に電圧を 印加することにより発光する電界発光素子であることを 特徴とする請求項6に記載の発光素子。

【請求項8】 請求項6または7に記載の発光素子と該 発光素子を駆動する部分を有することを特徴とする表示 装置。

#### 【発明の詳細な説明】

#### [0001]

【発明の属する技術分野】本発明は、金属配位化合物、 及び該金属配位化合物を用いた発光素子に関するもので あり、さらに詳しくは金属配位化合物を発光材料として 用いる有機エレクトロルミネッセンス素子(有機EL素 子)に関するものである。

#### [0002]

【従来の技術】有機EL素子は、高速応答性や高効率の 発光素子として、応用研究が精力的に行われている。そ の基本的な構成を図1(a)・(b)に示した[例えば Macromol. Symp. 125,  $1 \sim 48$  (19 97)参照]。

【0003】図1に示したように、一般に有機EL素子 は透明基板15上に透明電極14と金属電極11の間に 複数層の有機膜層から構成される。

【0004】図1(a)では、有機層が発光層12とホ 40 ール輸送層13からなる。透明電極14としては、仕事 関数が大きなITOなどが用いられ、透明電極14から ホール輸送層13への良好なホール注入特性を持たせて いる。金属電極11としては、アルミニウム、マグネシ ウムあるいはそれらを用いた合金などの仕事関数の小さ な金属材料を用い有機層への良好な電子注入性を持たせ る。これら電極には、50~200nmの膜厚が用いら れる。

【0005】発光層12には、電子輸送性と発光特性を 有するアルミキノリノール錯体など(代表例は、化3に 50 BCP:2,9-dimethy1-4,7-diph

示すA1q3)が用いられる。また、ホール輸送層13 には、例えばビフェニルジアミン誘導体(代表例は、化 3に示すα-NPD)など電子供与性を有する材料が用 いられる。

【0006】以上の構成した素子は整流性を示し、金属 電極11を陰極に透明電極14を陽極になるように電界 を印加すると、金属電極11から電子が発光層12に注 入され、透明電極15からはホールが注入される。

【0007】注入されたホールと電子は発光層12内で 再結合により励起子が生じ発光する。この時ホール輸送 層13は電子のブロッキング層の役割を果たし、発光層 12/ホール輸送層13界面の再結合効率が上がり、発 光効率が上がる。

【0008】 さらに、図1(b)では、図1(a)の金 属電極11と発光層12の間に、電子輸送層16が設け られている。発光と電子・ホール輸送を分離して、より 効果的なキャリアブロッキング構成にすることで、効率 的な発光を行うことができる。電子輸送層16として は、例えば、オキサジアゾール誘導体などを用いること 20 ができる。

【0009】これまで、一般に有機EL素子に用いられ ている発光は、発光中心の分子の一重項励起子から基底 状態になるときの蛍光が取り出されている。一方、一重 項励起子を経由した蛍光発光を利用するのでなく、三重 項励起子を経由したりん光発光を利用する素子の検討が なされている。発表されている代表的な文献は、文献 1: Improved energy transfe r in electrophosphorescen t device (D. F. O' Briens, App lied Physics Letters Vol 74, No3 p422(1999))、文献2:Ve ry high-efficiencygreen o rganic light-emitting dev icesbasd on electrophosph orescence (M. A. Baldoら、Appl ied Physics Letters Vol 7 5, No1 p4(1999))である。

【0010】これらの文献では、図1(c)に示す有機 層が4層構成が主に用いられている。それは、陽極側か らホール輸送層13、発光層12、励起子拡散防止層1 7、電子輸送層16からなる。用いられている材料は、 化3に示すキャリア輸送材料とりん光発光性材料であ る。各材料の略称は以下の通りである。

A1q3:アルミーキノリノール錯体

 $\alpha$ -NPD: N4, N4'-Di-naphthale n-1-y1-N4, N4'-dipheny1-bi pheny1-4,4'-diamine

CBP:4,4'-N,N'-dicarbazole -biphenyl

\* [0011]

7 enyl-1, 10-phenanthroline Ir(ppy)3:イリジウムーフェニルピリジン錯体 \*

【化3】

 $\alpha$  -NPD

ВСР

Alq3

CBP

Ir(ppy)<sub>3</sub>

【0012】文献1,2とも高効率が得られたのは、ホ ール輸送層13にα-NPD、電子輸送層16にAlq 3、励起子拡散防止層17にBCP、発光層12にCB 30 【0015】 Pをホスト材料として、6%程度の濃度で、りん光発光 性材料であるPtOEPまたはIr(ppy)3を混入 して構成したものである。

【0013】りん光性発光材料が特に注目されている理 由は、原理的に高発光効率が期待できるからである。そ の理由は、キャリア再結合により生成される励起子は1 重項励起子と3重項励起子からなり、その確率は1:3 である。これまでの有機EL素子は、1 重項励起子から 基底状態に遷移する際の蛍光を発光として取り出してい たが、原理的にその発光収率は生成された励起子数に対 40 して、25%でありこれが原理的上限であった。しか し、3重項から発生する励起子からのりん光を用いれ ば、原理的に少なくとも3倍の収率が期待され、さら に、エネルギー的に高い1重項からの3重項への項間交 差による転移を考え合わせれば、原理的には4倍の10 0%の発光収率が期待できる。

【0014】他に、三重項からの発光を要した文献に は、特開平11-329739号公報(有機EL素子及 びその製造方法)、特開平11-256148号公報 (発光材料およびこれを用いた有機EL素子)、特開平※50

※8-319482号公報(有機エレクトロルミネッセン ト素子)等がある。

【発明が解決しようとする課題】上記、りん光発光を用 いた有機EL素子では、特に発光効率と素子安定性が問 題となる。りん光発光素子の発光劣化の原因は明らかで はないが、一般に3重項寿命が1重項寿命より、3桁以 上長いために、分子がエネルギーの高い状態に長く置か れるため、周辺物質との反応、励起多量体の形成、分子 微細構造の変化、周辺物質の構造変化などが起こるので はないかと考えられている。

【0016】りん光発光素子に用いる、発光中心材料に は、高効率発光でかつ、安定性の高い化合物が望まれて いる。

【0017】そこで、本発明は、新規な発光材料を提供 し、それによって高効率発光で、長い期間高輝度を保 ち、長波長化が可能な発光素子及び表示装置を提供する ことを目的とする。

#### [0018]

【課題を解決するための手段】即ち、本発明の金属配位 化合物は、下記一般式(1)で示されることを特徴とす

 $ML_{\mathfrak{m}}L$ ' n (1)

[式中MはIrまたはPtの金属原子であり、Lおよび L'はEいに異なる二座配位子を示す。mは1または2または3であり、nは0または1または2である。ただ U、m+nは2または3である。部分構造MUnは下記 \*

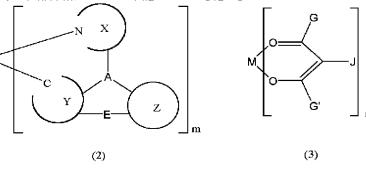
M<

\*一般式(2)で示され、部分構造ML'nは下記一般式 (3)または(4)で示される。

1.0

[0019]

【化4】



$$\mathsf{M} \left[ \begin{smallmatrix} \mathsf{O} & & \\ & & \mathsf{O} \\ & & & \mathsf{X}^\mathsf{T} \end{smallmatrix} \right]_{\mathsf{n}}$$

(4)

【0020】NとCは、窒素および炭素原子である。

【0021】X及びX'は窒素原子を介して金属原子M に結合した置換基を有していてもよい環状基であり、Y は炭素原子を介して金属原子Mに結合した置換基を有し ていてもよい環状基であり、Zは置換基を有していても よい環状基である。これら環状基の置換基はハロゲン原 子、シアノ基、ニトロ基、ジ置換アミノ基{該置換基は それぞれ独立して置換基を有していてもよいフェニル 基、ナフチル基(該置換基はハロゲン原子、メチル基ま たはトリフルオロメチル基または炭素原子数1から8の 直鎖状または分岐状のアルキル基であり、該アルキル基 中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。) または炭素原子数1から8の直鎖状または分岐状のアル キル基であり、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子 に置換されていてもよい。 } 、炭素原子数1から20の 直鎖状または分岐状のアルキル基 { 該アルキル基中の1 つもしくは隣接しない2つ以上のメチレン基は-0-、 -S-, -CO-, -CO-O-, -O-CO-, -CH=CH-、-C≡C-で置き換えられていてもよく、 該アルキル基中の1つもしくは2つ以上のメチレン基は 置換基を有していてもよい2価の芳香環基(該置換基は ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、炭素原子数1から 20の直鎖状または分岐状のアルキル基(該アルキル基 中の1つもしくは隣接しない2つ以上のメチレン基は一 0 - S - S - CO - CO - CO - CO - COー、一CH=CH-、-C≡C-で置き換えられていて もよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換 されていてもよい。)を示す。)で置き換えられていて※50

※もよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。 )、置換基を有していてもよいアリール基(該置換基はハロゲン原子、メチル基またはトリフルオロメチル基または炭素原子数1から8の直鎖状または分岐状のアルキル基であり、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。 )から選ばれる。また、隣接する置換基は結合して環構造を形成してもよい。

【0022】XとY、XとZは、A原子またはA原子団を介した共有結合によって結合している。

【0023】Aは、CR、N、B、SiR'であり、 R、R'は、水素原子、置換基を有していてもよいアリ ール基(該置換基はハロゲン原子、メチル基またはトリ フルオロメチル基または炭素原子数1から8の直鎖状ま たは分岐状のアルキル基であり、該アルキル基中の水素 原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)、または 炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル 基 {該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上 のメチレン基は一〇一、一S一、一CO一、一CO一〇 -、-O-CO-、-CH=CH-、-C≡C-で置き 換えられていてもよく、該アルキル基中の1つもしくは 2つ以上のメチレン基は置換基を有していてもよい2価 の芳香環基(該置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニト ロ基、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のア ルキル基(該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2 つ以上のメチレン基は-O-、-S-、-CO-、-C O-O-, -O-CO-, -CH=CH-,  $-C\equiv C-$ で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原

子はフッ素原子に置換されていてもよい。)を示す。) で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原 子はフッ素原子に置換されていてもよい。} から選ばれ

【0024】YとZは、E原子またはE原子団を介した 共有結合によって結合している。

【0025】Eは、単結合または炭素原子数1から4の 直鎖状または分岐状アルキレン基(該アルキレン基中の 1つのメチレン基は-O-、-S-、-CO-、-CO -O-, -O-CO-, -CH=CH-,  $-C\equiv C-$ ? 10 置き換えられていてもよく、該アルキレン基中の水素原 子はフッ素原子に置換されていてもよい。) から選ばれ

【0026】G, G'および」はそれぞれ独立して炭素 原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基 {該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上の メチレン基は一〇一、一S一、一C〇一、一C〇一〇 -、-O-CO-、-CH=CH-、-C≡C-で置き 換えられていてもよく、該アルキル基中の1つもしくは 2つ以上のメチレン基は置換基を有していてもよい2価 20 の芳香環基(該置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニト ロ基、トリアルキルシリル基(該アルキル基はそれぞれ 独立して炭素原子数1から8の直鎖状または分岐状のア ルキル基である。)、炭素原子数1から20の直鎖状ま たは分岐状のアルキル基(該アルキル基中の1つもしく は隣接しない2つ以上のメチレン基は-0-、-S-、 -CO-, -CO-O-, -O-CO-, -CH=CH\*

\*-、-C≡C-で置き換えられていてもよく、該アルキ ル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよ い。) を示す。また、隣接する置換基は結合して環構造 を形成してもよい。)で置き換えられていてもよく、該 アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていて して置換基を有していてもよいフェニル基、ナフチル基 (該置換基はハロゲン原子、メチル基またはトリフルオ ロメチル基である。) または炭素原子数1から8の直鎖 状または分岐状のアルキル基であり、該アルキル基中の 換基を有していてもよいアリール基(該置換基はハロゲ ン原子、メチル基またはトリフルオロメチル基または炭 素原子数1から8の直鎖状または分岐状のアルキル基で あり、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換さ れていてもよい。)から選ばれる。また、Jは水素原子 であってもよい。]

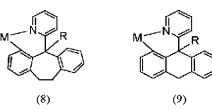
12

【0027】本発明の金属配位化合物は、前記一般式 (1)においてnがOであること、前記一般式(1)に おいて部分構造ML'nが前記一般式(3)で示される こと、前記一般式(1)において部分構造ML' nが前 記一般式(4)で示されることが好ましい。

【0028】また、前記一般式(1)において、前記一 般式(2)で示される部分構造M Laが、下記一般式 (5)  $\sim$  (9) から選ばれることが好ましい。

[0029]

【化5】



【0030】「環状基は置換基を有してもよく、これら の置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ジ置換 アミノ基〈該置換基はそれぞれ独立して置換基を有して いてもよいフェニル基、ナフチル基(該置換基はハロゲ ン原子、メチル基またはトリフルオロメチル基または炭 素原子数1から8の直鎖状または分岐状のアルキル基で あり、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換さ れていてもよい。)または炭素原子数1から8の直鎖状 または分岐状のアルキル基であり、該アルキル基中の水 素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。}、炭素※50 つ以上のメチレン基は-O-、-S-、-CO-、-C

※原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基 {該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上の メチレン基は一〇一、一S一、一〇〇一、一〇〇一〇 ー、一〇一〇〇一、一〇H=CHー、一〇≡Cーで置き 換えられていてもよく、該アルキル基中の1つもしくは 2つ以上のメチレン基は置換基を有していてもよい2価 の芳香環基(該置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニト 口基、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のア ルキル基(該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2

O-O-、-O-CO-、-CH=CH-、-C≡C-で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)を示す。)で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。〉、置換基を有していてもよいアリール基(該置換基はハロゲン原子、メチル基またはトリフルオロメチル基または炭素原子数1から8の直鎖状または分岐状のアルキル基であり、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)から選ばれる。また、隣接する置換基 10は結合して環構造を形成してもよい。〕

【0031】本発明の発光素子は、上記金属配位化合物を含む有機化合物層を有することを特徴とし、前記金属配位化合物を含む有機化合物層が、対向する2つの電極に狭持され、該電極間に電圧を印加することにより発光する電界発光素子であることが好ましい。

【0032】更に、本発明の表示装置は、上記発光素子を表示素子と該発光素子を駆動する部分を有することを特徴とする。

### [0033]

【発明の実施の形態】発光層が、キャリア輸送性のホスト材料とりん光発光性のゲストからなる場合、3重項励起子からのりん光発光にいたる主な過程は、以下のいくつかの過程からなる。

- 1. 発光層内での電子・ホールの輸送
- 2. ホストの励起子生成
- 3. ホスト分子間の励起エネルギー伝達
- 4. ホストからゲストへの励起エネルギー移動
- 5. ゲストの三重項励起子生成
- 6. ゲストの三重項励起子→基底状態時のりん光発光 【0034】それぞれの過程における所望のエネルギー 移動や、発光はさまざまな失活過程と競争でおこる。

【0035】EL素子の発光効率を高めるためには、発光中心材料そのものの発光量子収率が大きいことは言うまでもない。しかしながら、ホストーホスト間、あるいはホストーゲスト間のエネルギー移動が如何に効率的にできるかも大きな問題となる。また、通電による発光労化は今のところ原因は明らかではないが、少なくとも発光中心材料そのもの、または、その周辺分子による発光材料の環境変化に関連したものと想定される。

【0036】そこで本発明者らは種々の検討を行い、前記一般式(1)で示される金属配位化合物を発光中心材料に用いた有機エレクトロルミネッセント素子が高効率発光し、長い期間高輝度を保ち、通電劣化が小さいことを見出した。

【0037】前記一般式(1)で示される金属配位化合物のうち、nが0である場合、部分構造ML'nが前記一般式(3)で示される場合、あるいは部分構造ML'nが前記一般式(4)で示される場合が好ましい。また、前記一般式(2)で示される部分構造MLnが、前

記一般式(5)~(9)から選ばれることが好ましい。 【0038】本発明に用いた金属配位化合物は、りん光性発光をするものであり、最低励起状態が、3重項状態のMLCT\*(Metal-to-Ligand charge transfer)励起状態あるいは $\pi-\pi$ \*励起状態であると考えられる。これらの状態から基底状態に遷移するときにりん光発光が生じる。

【0039】本発明の発光材料のりん光収率は、0.01以上の高い値が得られ、りん光寿命は0.1~100μsecと短寿命であった。りん光寿命が短いことは、EL素子にしたときに高発光効率化の条件となる。すなわち、りん光寿命が長いと、発光待ち状態の3重項励起状態の分子が多くなり、特に高電流密度時に発光効率が低下すると言う問題があった。本発明の材料は、高りん光発光収率を有し、短りん光寿命をもつEL素子の発光材料に適した材料である。実際に、通電試験においても本発明の発光材料を用いると高い安定性をしめした。

【 0 0 4 0 】本発明の発光素子は、一般式(1)で示される金属配位化合物を含む有機化合物層を有し、図1に 示す様に、該金属配位化合物を含む層が、対向する2 つの電極に狭持され、該電極間に電圧を印加することにより発光する電界発光素子であることが好ましい。

【0041】本発明で示した高効率な発光素子は、省エネルギーや高輝度が必要な製品に応用が可能である。応用例としては表示装置・照明装置やプリンターの光源、液晶表示装置のバックライトなどが考えられる。表示装置としては、省エネルギーや高視認性・軽量なフラットパネルディスプレイが可能となる。また、プリンターの光源としては、現在広く用いられているレーザビームプリンタのレーザー光源部を、本発明の発光素子に置き換えることができる。独立にアドレスできる素子をアレイ上に配置し、感光ドラムに所望の露光を行うことで、画像形成する。本発明の素子を用いることで、装置体積を大幅に減少することができる。照明装置やバックライトに関しては、本発明による省エネルギー効果が期待できる。

【0042】ディスプレイへの応用では、アクティブマトリクス方式であるTFT駆動回路を用いて駆動する方式が考えられる。

40 【0043】以下、図4~6を参照して、本発明の素子 において、アクティブマトリクス基板を用いた例につい て説明する。

【0044】図4は、EL素子と駆動手段を備えたパネルの構成の一例を模式的に示したものである。パネルには、走査信号ドライバー、情報信号ドライバー、電流供給源が配置され、それぞれゲート選択線、情報信号線、電流供給線に接続される。ゲート選択線と情報信号線の交点には図5に示す画素回路が配置される。走査信号ドライバーは、ゲート選択線G1、G2、G3...Gn を順次選択し、これに同期して情報信号ドライバーから

画像信号が印加される。

【0045】次に画素回路の動作について説明する。この画素回路においては、ゲート選択線に選択信号が印加されると、TFT1がONとなり、Caddに画像信号が供給され、TFT2のゲート電位を決定する。EL素子には、TFT2のゲート電位に応じて、電流供給線より電流が供給される。TFT2のゲート電位は、TFT1が次に走査選択されるまでCaddに保持されるため、EL素子には次の走査が行われるまで流れつづける。これにより1フレーム期間常に発光させることが可10能となる。

【0046】図6は、本発明で用いられるTFT基板の断面構造の一例を示した模式図である。ガラス基板上にp-Si層が設けられ、チャネル、ドレイン、ソース領域にはそれぞれ必要な不純物がドープされる。この上にゲート絶縁膜を介してゲート電極が設けられると共に、上記ドレイン領域、ソース領域に接続するドレイン電極、ソース電極が形成されている。これらの上に絶縁

\*層、及び画素電極としてITO電極を積層し、コンタクトホールにより、ITOとドレイン電極が接続される。 【0047】本発明は、スイッチング素子に特に限定はなく、単結晶シリコン基板やMIM素子、a-Si型等でも容易に応用することができる。

16

【0048】上記ITO電極の上に多層あるいは単層の有機EL層/陰極層を順次積層し有機EL表示パネルを得ることができる。本発明の発光材料を発光層に用いた表示パネルを駆動することにより、良好な画質で、長時間表示にも安定な表示が可能になる。

【0049】以下本発明に用いられる金属配位化合物の 具体的な構造式を表1から表7に示す。但し、これら は、代表例を例示しただけで、本発明は、これに限定さ れるものではない。表1~表7に使用している略記は以 下に示した構造を表している。

[0050]

【化6】

【0051】

※ ※【表1】

							,	,				1 3 12 13 -
	17											18
									L			
No	М	m	n	L	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>4</sub>	R <sub>5</sub>	R <sub>6</sub>	R <sub>7</sub>	R <sub>8</sub>
1	lr	3	0	Cz	Н	H	H	Н	Н	Н	Н	-
2	ir	3	0	Cz	Н	CH <sub>3</sub>	Н	Ι	Н	Н	Н	-
3	Îr	3	0	Çz	Н	Н	CH <sub>3</sub>	Н	Н	Н	Н	
4	Ir	3	0	Oz	Н	CF <sub>3</sub>	Н	Н	Н	Н	Н	_
5	İr	3	٥	Oz	Н	Н	CF <sub>3</sub>	Н	Н	Н	Η	-
6	Ir	3	0	Cz	Н	F	Н	Н	Н	Н	Н	-
7	Ir	3	0	Cz	Н	Н	F	Н	Н	Н	Н	-
8	Ir	3	0	Cz	Н	Н	Н	Н	CF <sub>3</sub>	CF <sub>3</sub>	Н	_
9	Ir	3	0	Cz	Η	Н	Н	[ H	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	Н	_
10	Îr	3	0	Cz	Н	H	Н	Н	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	Н	_
11	Ir	з	O	Cz	Н	Н	Н	Н	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	Н	
12	Ir	3	0	Cz	Н	Н	Н	Н	C₄H <sub>9</sub>	C₄H <sub>9</sub>	H	-
13	Îr	3	0	Cz	Н	Н	H	H	G <sub>8</sub> H <sub>17</sub>	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub>	Н	_
14	Ir	3	0	Cz	H	Н	Ι	Н	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C	Н	
15	lr	3	0	Cz	Н	Н	Ι	Н	F	F	Н	_
16	lr	3	0	Cz	Н	Н	H	Н	Ph	Ph	Н	_
17	lr	3	0	Çz	Н	н	Н	Н	CH₃O	CH <sub>3</sub> O	Н	_
18	lr	3	0	Cz	Н	Н	H	Н	C₂H₅O	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O	Н	_
19	lr	3	0	Cz	Н	Н	Н	Н	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> O	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> O	Н	_
20	lr	3	0	Cz	Н	Н	н	Н	CF₃O	CF <sub>3</sub> O	Н	_
21	lr	3	9	Cz	Н	Н	Н	CH₃	Н	H	CH₃	_
22	lr	3	0	Cz	CH <sub>3</sub>	Н	Н	Н	Н	Н	Н	_
23	lr	3	0	Cz	Н	CF <sub>3</sub>	Н	Н	CF <sub>3</sub>	CF <sub>3</sub>	Н	_
24	lr	3	0	Cz	Н	Н	F	Н	CF <sub>3</sub>	CF <sub>3</sub>	Н	_
25	lr	3	0	Cz	Н	CH <sub>3</sub>	Н	Н	CF₃O	CF <sub>3</sub> O	Н	_
26	İr	3	0	Cz	Η	H	H	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	_
27	<u>l</u> r	3	0	Cz	Η	Н	H	CF <sub>3</sub>	CF <sub>3</sub>	ĊF₃	CF <sub>3</sub>	-
28	lr	3	0	Cz	Н	Н	CF <sub>3</sub>	CF <sub>3</sub>	CF <sub>3</sub>	CF₃	CF <sub>3</sub>	_
29	lr	3	0	Cz	Н	Н	Н	F	F	F	F	-
30	lr	3	0	Cz	Н	Н	Н	Н	C <sub>4</sub> F <sub>9</sub>	C <sub>4</sub> F <sub>9</sub>	Н	
31	Ĭr	3	0	Çz	Н	Н	Н	ÇH₃	Н	Н	H	_
32	Ĭr	3	0	Cz	Н	н	Н	Н	CH₃	Н	Н	-
32	ir	3	0	Cz	Н	Н	Н	CH <sub>3</sub>	н	CH <sub>3</sub>	Н	

[0052] \* \*【表2】

No	М	m	n	L	L				<u>L</u>			
			L.,		R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>4</sub>	R <sub>5</sub>	R <sub>B</sub>	R <sub>7</sub>	Ra
33	lr	3	0	FI	Н	Н	Н	н	Н	Н	Н	H
34	<u>ir</u>	3	0	FI	Н	Н	Н	н	H	н	Н	CH₃
35	lr	3	0	FI	н	Н	н	Н	Н	н	Н	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>
36	[r	3	0	FI	Н	н	Н	н	Н	н	Н	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>
37	Îr	3	0	FI	н	Н	Н	Н	Н	н	Н	C <sub>B</sub> H <sub>17</sub>
38	Ir	3	0	FI	Н	н	Н	н	Н	Н	Н	Ph
39	İr	3	0	FI	Н	ÇH₃	Н	Н	Н	Н	Н	CH <sub>3</sub>
40	Ir	3	0	FI	н	Н	CH <sub>3</sub>	Н	Η	Н	Н	CH <sub>3</sub>
41	Ir	3	0	FI	Н	ÇF <sub>3</sub>	Н	Н	Н	Н	Н	CH <sub>3</sub>
42	Ir	3	0	FI	Н	Н	CF <sub>3</sub>	Н	Н	Н	Н	CH <sub>3</sub>
43	Ir	3	0	FI	Н	F	Н	Н	Н	Н	Н	CH <sub>3</sub>
44	Ir	3	0	FI	Н	Н	F	Н	Н	Н	Н	CH <sub>3</sub>
45	Ir	3	0	FI	ÇH₃	H	Н	Н	Н	Н	Н	ÇH₃
46	Ir	3	0	FI	Н	Н	Н	CF <sub>3</sub>	Н	Н	CF <sub>3</sub>	Η
47	Iг	3	0	FI	Н	н	Н	CF <sub>3</sub>	Н	Н	CF <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>
48	Ir	3	0	FI	Н	Н	Н	CF <sub>3</sub>	Ι	1	CF <sub>3</sub>	Ph
49	lr	3	0	F	H	H	Н	CH <sub>3</sub>	I	Ι	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>
50	1r	3	0	FI	Н	Н	Н	C₂H₅	H	Ι	G₂H <sub>5</sub>	OH <sub>3</sub>
51	lr	3	0	FI	Ι	Ξ	H	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	H	H	C₃H₁	CH <sub>3</sub>
52	lr	3	0	Ē	Ι	Ι	Н	C₄H <sub>9</sub>	I	H	C₄H <sub>9</sub>	CH <sub>3</sub>
53	ir	3	0	F	Н	Ι	Н	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub>	I	Η	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub>	CH <sub>3</sub>
54	lr	з	0	Fl	H	H	н	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C	Н	Н	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C	СНз
55	Ir	3	0	FI	I	H	Н	F	Н	Н	F	CH <sub>3</sub>
56	lr	3	0	FI	H	Н	Н	F	Н	Н	F	Ph
57	lr	3	0	Fl	I	Н	Н	Ph	Ι	Η	Ph	CH <sub>3</sub>
58	lr	3	0	FI	Η	Н	н	CH <sub>3</sub> O	Ι	Н	CH₃O	CH <sub>3</sub>
59	lr	3	0	FI	H	Н	Н	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O	Н	Н	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O	CH <sub>3</sub>
60	lr	з	0	FI	Н	Н	Н	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> O	Ι	Н	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> O	CH₃
61	lr	3	0	FI	Н	Н	Н	CF <sub>3</sub> O	Н	Н	CF <sub>3</sub> O	CH <sub>3</sub>
62	Ir	3	0	FI	Н	н	Н	CH₃	Н	H	CH₃	Н
63	ĺr	3	0	F)	Н	Н	н	Н	CH <sub>3</sub>	ÇH₃	Н	CH <sub>3</sub>
64	Ir	3	O	Fì	Н	Н	н	н	CFa	CF <sub>3</sub>	Н	CH₃
65	İr	3	0	FI	Н	н	F	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>
66	I۲	3	0	FI	Н	н	Н	CF <sub>3</sub>	CF <sub>a</sub>	CF <sub>3</sub>	CF <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>
67	lr	3	0	FI	Н	Н	CF <sub>3</sub>	CF <sub>3</sub>	CF <sub>a</sub>	CF <sub>3</sub>	CF <sub>3</sub>	Ph

[0053]

\* \*【表3】

No	м	m	_									
NO	IVI	m	n	1	R₁	R <sub>2</sub>	$R_3$	R <sub>4</sub>	R <sub>5</sub>	R <sub>6</sub>	R <sub>7</sub>	R <sub>8</sub>
68	Įr	ß	0	Dc	I	Н	H	H	Ξ	Н	Н	Н
69	Ir	3	0	Dc1	Н	Н	Ŧ	Н	H	Н	Н	CH <sub>3</sub>
70	İr	3	0	Dc1	Н	I	Η	H	Н	Н	Н	Ph
71	Īr	ფ	0	Dc1	H	I	CH <sub>3</sub>	Н	Н	Н	н	CH <sub>3</sub>
72	Ir	ო	0	Dc1	Н	CF <sub>3</sub>	Н	H	Н	Н	Н	ÇH₃
73	l	ფ	0	Dc1	Н	F	Н	H	CH3	CH₃	Н	CH <sub>3</sub>
74	Îr	3	0	Dol	H	Н	F	CF <sub>3</sub>	Н	Н	CF <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>
75	ŀ	3	0	Dc1	Н	H	Н	H	CF <sub>3</sub> O	CF <sub>3</sub> O	Н	CH <sub>3</sub>
76	lr	3	0	De1	H	T	Н	H	F	F	Н	CH <sub>3</sub>
77	lr	3	0	Dc1	Н	H	Н	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C	I	Н	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C	CH <sub>3</sub>
78	lr	3	0	Dc1	I	Ι	Н	CH <sub>3</sub> O	H	Н	CH <sub>3</sub> O	Н
79	lr	3	0	Dc1	Н	Н	H	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	CH₃	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>
80	lr	3	0	Dc1	H	Н	Н	F	H	Н	F	Ph
81	lr	3	0	Dc1	Н	Н	Н	H	C₅H <sub>11</sub>	C₅H <sub>11</sub>	н	CH <sub>3</sub>
82	lr	3	0	Dc1	Н	Н	Н	Н	CF <sub>3</sub> O	CF <sub>3</sub> O	Н	Ph

[0054]

※ ※【表4】

CH₃

Ph

21

96 Ir 3 0 Dc2

97 Ir 3 0 Dc2

No	м			L	L							
140	¥	m	n		R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	$R_3$	R₄	R <sub>5</sub>	R <sub>6</sub>	R <sub>7</sub>	RB
83	lr	3	0	Dc2	Η	Н	Η	Н	Η	Н	H	H
84	lr	3	0	Dc2	Ι	H	н	Н	Ι	Н	Н	CH <sub>3</sub>
85	lr	3	•	Dc2	Ι	Н	н	Н	I	Н	Н	Ph
86	lr	3	٥	Dc2	H	Н	CH₃	Н	H	Н	Н	CH <sub>3</sub>
87	lr	3	٥	Dc2	1	CF <sub>3</sub>	H	Н	Η	Н	Н	CH₃
88	lr	3	0	Dc2	Ι	F	Η	н	CH <sub>3</sub>	ď	Н	CH₃
89	ŀ	3	0	Dc2	Н	Н	F	CF <sub>3</sub>	Н	Н	CF <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>
90	lr	3	0	Dc2	Н	Н	Н	Н	CF <sub>3</sub> O	CF <sub>3</sub> O	Н	CH <sub>3</sub>
91	lr	ო	0	Dc2	1	H.	Н	H	F	F	Н	CH <sub>3</sub>
92	ŀ	8	0	Dc2	H	H	Н	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C	Н	Н	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C	CH <sub>3</sub>
93	lr	က	٥	Do2	Н	Н	Н	CH₃O	Н	Н	CH <sub>3</sub> O	Н
94	lr	3	0	Dc2	Н	Н	Н	CH <sub>3</sub>	CH₃	CH₃	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>
95	[r	3	٥	Dc2	Ι	Н	Н	F	Н	Н	F	Ph

Н

Н

н

Н

[0055]

\* \*【表5】

Н

C₃H<sub>7</sub>

C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>

CF<sub>3</sub>O CF<sub>3</sub>O

No	м				L											
INO	IVI	æ	n	_	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>4</sub>	R <sub>5</sub>	R <sub>6</sub>	$R_7$	Re				
98	lr	3	٥	Da	Н	Н	Н	Н	Н	Н	Н	Н				
99	<u>l</u> r	3	0	Da	Н	Н	Н	Н	Н	н	н	CH <sub>3</sub>				
100	[r	3	٥	Da	H	н	H	H	Н	н	Н	Ph				
101	lr	3	0	Da	Н	H	CH <sub>3</sub>	H	Н	Н	Н	CH₃				
102	lr	3	0	Dα	Н	CF <sub>3</sub>	Н	Н	Н	Н	н	CH₃				
103	[r	3	0	Da	Н	F	Н	Ħ	CH <sub>3</sub>	CH₃	H	CH₃				
104	Ir	3	0	Da	H	Н	F	CF <sub>3</sub>	Н	н	CF₃	CH₃				
105	Ir	3	0	Da	Н	н	Н	Н	CF <sub>3</sub> O	CF₃O	H	СНз				
106	Ir	3	0	Da	Η	Н	Н	I	F	F	Н	CH₃				
107	İr	3	0	Da	Ι	Н	Н	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C	Н	Н	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C	CH₃				
108	Ir	3	٥	Da	Ι	Н	H	CH <sub>3</sub> O	Н	Н	CH₃O	Н				
109	İr	3	0	Da	Н	Н	Н	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	CH₃				
110	Ir	3	0	Da	Н	Н	Н	F	Н	Н	F	Ph				
111	Ir	3	0	Da	Η	Н	Н	Н	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub>	Ç <sub>7</sub> H <sub>15</sub>	Н	CH <sub>3</sub>				
112	lr	3	0	Da	H	Н	Ħ	Н	CF <sub>3</sub> O	CF <sub>3</sub> O	Н	Ph				

[0056]

※30※【表6】

$\sim$	$\sim$
_	_

		2	3											2	24	
No	м		n	L					L					L'		
NO	141	m	=	_	R	R <sub>2</sub>	R₃	R <sub>4</sub>	R₅	R <sub>6</sub>	R <sub>7</sub>	R <sub>3</sub>	Ğ	G.	J	X.
113	[r	2	1	Cz	Н	Н	Ξ	H	Н	Ι	Н	1	CH <sub>3</sub>	CH₃	Ξ	-
114	Ŀ	2	1	Cz	Ι	Ξ	Ξ	Н	Н	Ξ	Н	ı	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	
115	4	2	1	Cz	Η	Η	Η	Н	Н	Η	Н	ı	_			Рy
116	ŀ	2	1	Cz	Ξ	Н	Ξ	Н	Н	Ξ	Н		C₂H₅	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	Н	
117	ŀ	2	-	Cz	Н	Н	Н	H	Н	Ι	Н	-	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	Н	-
118	1r	2	+	Çz	Ξ	Ξ	Ι	Ξ	Н	I	Η	ı	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	C₄H <sub>9</sub>	Н.	-
119	1r	2	1	Cz	Н	Н	Н	Н	Н	Ι	Ι	ı	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub>	C <sub>a</sub> H <sub>17</sub>	Н	-
120	Ir	2	1	Cz	Ħ	Η	Η	H	Н	Ŧ	Ξ	ı	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C	Н	
121	Ir	2	1	Cz	H	Н	Ι	H	I	Ι	Η	ł	Ph	Ph	H	-
122	Ir	2	1	Cz	H	Ŧ	Ι	Ι	Ή	I	H	-	CF <sub>3</sub>	CF <sub>3</sub>	Н	-
123	Ir	2	1	Cz	Η	H	Τ	Ι	Η	I	Η	1	CF <sub>3</sub>	CH₃	Н	_
124	Ir	2	1	Cz	Ħ	Η	Ι	Ι	CF <sub>3</sub>	CF <sub>3</sub>	Η	-	CH₃	CH <sub>3</sub>	Н	_
125	Ir	2	1	Cz	H	Н	Ŧ	Η	CH <sub>3</sub>	CHa	H		CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	Н	-
126	Ir	2	1	Cz	Н	Η	Η	Ξ	(CH <sub>2</sub> )3C	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C	Η	ł	CH <sub>3</sub>	CH <sub>8</sub>	Н	_
127	Īr	2	1	C	Η	Ξ	Ι	Ħ	F	F	Н	ı	CH₃	CH <sub>3</sub>	Η	_
128	lr	2	1	Cz	Ħ	Н	Ξ	H	CH₃O	CH3O	Ξ	ı	CH₃	CH₃	Ħ	-
129	Ir	2	1	Cz	Н	Н	Η	H	CF <sub>3</sub> O	CF₃O	Ξ	-	CH₃	CH <sub>3</sub>	Н	-
130	Ir	2	1	Cz	Н	Н	Н	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	CH₃	CH₃	1	CH₃	CH₃	Н	-
131	lr	2	1	Cz	Н	Н	Н	CF <sub>3</sub>	CF <sub>3</sub>	CF <sub>3</sub>	CF <sub>3</sub>	-	CH <sub>3</sub>	CH₃	Τ	-
132	Ir	2	1	Cz	Н	Н	Н	F	F	F	F	-	CH <sub>3</sub>	CH₃	I	-
133	Ir	2	1	Dç1	Н.	Ξ	H	Н	Н	Н	H	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>a</sub>	Н	-
134	<u>I</u> r	2	1	D¢1	Н	Н	Н	Н	Н	Н	Н	CH <sub>3</sub>	_	_	-	Py
135	Ir	2	1	Dc2	Н	Н	Н	Н	Н	Н	H	CH <sub>3</sub>	CH <sub>a</sub>	CH <sub>3</sub>	Н	-
136	Ir	2	1	Dc2	Н	Н	Н	Η	Н	Н	Н	CH₃		_	-	Рy
137	Ir	2	1	Da	Н	Ξ	Н	Н	Н	Н	Н	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	Ι	- "
138	Ir	2	1	Da	Н	Н	Н	Н	H	Н	Н	CH <sub>3</sub>	-	_	-	Py

#### [0057]

## \*【表7】

No	м		_	L		L L								Ľ		
NO	199	m	n	_	R <sub>1</sub>	R2	R <sub>3</sub>	R,	R	R	R <sub>7</sub>	₽B	G	G'	7	X.
139	ĺr	2	1	F	π	Η	Н	Н	Ι	Ξ	Н	Н	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	I	-
140	ľ	2	1	드	Η	H	Н	Ξ	Η	Ξ	Н	CH <sub>3</sub>	CH₃	CH <sub>3</sub>	Н	-
141	Ir	2	1	E	Η	Ξ	Н	Н	I	I	Н	CH <sub>3</sub>	CH₃	CH3	CH <sub>3</sub>	1
142	Ir	2	1	Ē	Ξ	Н	H	Н	H	I	Н	CH <sub>3</sub>	_	-	-	Py
143	Îr	2	1	FI	H	Н	Н	Н	Η	Ŧ	Н	C <sub>4</sub> H <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	Н	_
144	İr	2	1	Œ	Н	Ή	Н	Н	H	Ŧ	Ξ	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	H	-
145	Īr	2	1	F	Ŧ	Ξ	Ξ	Н	Η	Ξ	Ħ	Ph	CH₃	CH <sub>3</sub>	Н	_
146	Ir	2	1	Ē	Η	H	Н	Н	Н	H	Н	CH₃	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub>	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub>	Н	-
147	Ir	2	1	됴	Ξ	H	Н	Н	Н	Н	Н	CH₃	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C	I	-
148	Ir	2	1	F	1	H	Н	Н	Н	Η	Н	CH₃	Ph	Ph	H	-
149	Ir	2	1	Ē	Ξ	H	Ξ	CF <sub>3</sub>	Н	Ξ	CF <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	CH₃	H	-
150	Ρt	2	0	Cz	Ħ	Н	Ι	Н	Н	Η	Н	-	-	-		_
151	Pt	2	0	Ē	Ή	Н	Ι	Н	Н	Η	Τ	CH <sub>3</sub>	-	-	-	
152	Pt	1	1	Cz	Н	Н	Н	Н	Н	Н	Н	_	CH <sub>3</sub>	CH₃	Н	_
153	Ρt	1	1	FI	Н	Н	Н	Н	Н	Н	Н	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	Н	_
154	7	1	_	Cz	H	H	Н	Н	Н	Н	Н	-	-	-	-	Ру

# [0058]

【実施例】以下に実施例を挙げて本発明を具体的に説明 する。但し、本発明はこれらに限定されるものではな 11

【0059】<実施例1>例示化合物113の合成 ①2-(9H-カルバゾール-9-イル)-ピリジンの合成

反応容器にカルバゾール18.8g(111mmo 1)、2-ヨードピリジン25g(122mmo1)、 炭酸カリウム23g(167mmo1)、銅粉7g(1 11mmo1)、o-ジクロロベンゼン(ODC)50 m1を仕込み、180℃で24時間撹拌を行った。反応 物を室温まで冷却してトルエン100mlを注入し、沈 殿物を沪取した。沪液を濃縮した後、クロロホルムを溶 離液としたシリカゲルカラムクロマトで精製を行った。pprox 50 カルバゾールー9-イル)-ピリジン- $\mathbb{C}^1$ , $\mathbb{N}$   $\mathbb{D}^2$  ( $\mathbb{D}^2$ 

※ヘキサン-エタノール溶液で再結晶を行い、2-(9H -カルバゾール-9-イル)-ピリジン9.8g(40 mmo1、収率36%)を得た。

【0060】**②**テトラキス[2-(9H-カルバゾール 40 -9-4ル) -ピリジン-C<sup>1</sup>, N] ( $\mu$ -ジクロロ) ジイリジウム(III)の合成

200m1の3つ口フラスコに塩化イリジウム(II I)·3水和物0.58g(1.64mmo1)、2-(9H-カルバゾール-9-イル)ーピリジン1.01 g(4mmol)、エトキシエタノール45mlと水15m1を入れ、窒素気流下室温で30分間攪拌し、その 後24時間還流攪拌した。反応物を室温まで冷却し、沈 殿物を沪取水洗後、エタノールおよびアセトンで順次洗 浄した。室温で減圧乾燥し、テトラキス[2-(9H-

ージクロロ)ジイリジウム(III)の粉末1.05g (収率90%)を得た。

【0061】**③**ビス「2-(9H-カルバゾール-9-イル)-ピリジン-C $^{1}$ ,N] (アセチルアセトナト) イリジウム(III)(例示化合物113)の合成 200m1の3つ口フラスコにエトキシエタノール70 m1、テトラキス「2-(9H-カルバゾール-9-イ  $\mathcal{N}$ ) -ピリジン- $\mathbb{C}^1$ ,  $\mathbb{N}$ ] ( $\mu$ -ジクロロ) ジイリジ ウム(III) 1.03g(0.72mmol)、アセ チルアセトン0.22g(2.10mmol)と炭酸ナ 10 レン-9-4ル)ーピリジン6.5g(25mmol)トリウム1.04g(9.91mmol)を入れ、窒素 気流下室温で1時間攪拌し、その後15時間還流攪拌し た。反応物を氷冷し、沈殿物を沪取水洗した。この沈殿 物をシリカゲルカラムクロマト(溶離液:クロロホルム /メタノール:30/1)で精製し、ビス[2-(9H -カルバゾール-9-イル)-ピリジン-C<sup>1</sup>,N](アセチルアセトナト) イリジウム(III) (例示化 合物No. 113)の粉末0. 70g(収率62%)を 得た。MALDI-TOF MSによりこの化合物のM +である778.2を確認した。

【0062】<実施例2>例示化合物1の合成

100m1の3つ口フラスコに、実施例1と同様にして 合成した2-(9H-カルバゾール-9-イル)-ピリ ジン0.31g(1.25mmo1)、実施例1と同様 にして合成したビス[2-(9H-カルバゾール-9- $\{A, B, B\}$   $\{A, B\}$ イリジウム(III) 0.399g(0.5mmo1) とグリセロール25m1を入れ、窒素気流下180℃付 近で8時間加熱攪拌した。反応物を室温まで冷却して水 150m1に注入し、沈殿物を沪取・水洗し、100℃ で5時間減圧乾燥した。この沈殿物をクロロホルムを溶 離液としたシリカゲルカラムクロマトで精製し、トリス [2-(9H-カルバゾール-9-イル)ーピリジンー  $C^1$ , N] イリジウム(III) (例示化合物No. 1)の粉末0.20g(収率44%)を得た。MALD I-TOF MSによりこの化合物のM⁺である92 2.2を確認した。

【0063】<実施例3>例示化合物140の合成  $\bigcirc$ 2-(9-メチル-9H-フルオレン-9-イル)-ピリジンの合成

反応容器にフルオレン13.6g(82mmo1)、乾 燥テトラヒドロフラン(THF)200m1を仕込み、 窒素気流下-60℃に冷却を行った。1.6Mのn-ブ チルリチウム(nBuLi)51.2m1(82mmo 1)をゆっくりと滴下した後、0℃で1時間撹拌を行っ た。再び、-60℃に冷却を行った後、2-ヨードピリ ジン16.8g(82mmo1)の乾燥THF20m1 溶液をゆっくりと滴下した後、10℃で1時間撹拌を行 った。再び、-60℃に冷却を行った後、1.6Mのn BuLi51.2ml(82mmol)をゆっくりと滴 50

下した後、0℃で1時間撹拌を行った。再び、−60℃ に冷却を行った後、2-ヨードピリジン11.6g(8) 2mmol)の乾燥THF20m1溶液をゆっくりと滴 下した後、10℃で2時間撹拌を行った。反応溶液を氷 水に注入し、トルエンで抽出を行った。有機層を水で洗 浄した後、硫酸マグネシウムで乾燥した。有機層を濃縮 した後、トルエン/THF(10/1)を溶離液とした シリカゲルカラムクロマトで精製を行った。エタノール 溶液で再結晶を行い、2-(9-メチル-9H-フルオ 収率31%)を得た。

【0064】**②**ビス[2-(9-メチル-9H-フルオ レン-9-イル) -ピリジン-C1, N] (アセチルア セトナト)イリジウム(III)(例示化合物140) の合成

2-(9H-カルバゾール-9-イル)-ピリジンの代 わりに2-(9-メチル-9H-フルオレン-9-イ ル)-ピリジンを用いる以外は実施例13の反応と同様 にしてビス[2-(9-メチル-9H-フルオレン-9 ト) イリジウム(III) (例示化合物140) を合成 した。MALDI-TOF MSによりこの化合物のM +である776.2を確認した。

【0065】<実施例4>例示化合物34の合成 2-(9H-カルバゾール-9-イル)-ピリジンの代 わりに2-(9-メチル-9H-フルオレン-9-イ ル) - ピリジンを、ビス [ 2 - ( 9 H - カルバゾールー  $9-4\nu$ ) -  $\mathbb{C}^{1}$ ,  $\mathbb{N}$  ] ( $\mathbb{C}^{1}$ ト) イリジウム(III)の代わりにビス[2-(9-メチルー9H-フルオレンー9ーイル)ーピリジンーC 1, N] (アセチルアセトナト) イリジウム (III) を用いる以外は実施例2と同様にしてトリス2-(9-メチルー9Hーフルオレンー9ーイル) ーピリジンーC 1, N] イリジウム(III) (例示化合物34)を合 成した。MALDI-TOF MSによりこの化合物の M+である961.3を確認した。

【0066】<実施例5~8>本実施例では、素子構成 として、図1(c)に示す有機層が4層の素子を使用し た。ガラス基板(透明基板15)上に100nmのIT ○ (透明電極14)をパターニングした。そのITO基 板上に、以下の有機層と電極層を10-4Paの真空チャ ンバー内で抵抗加熱による真空蒸着して連続製膜し、対 向する電極面積が3mm<sup>2</sup>になるようにした。

有機層1(ホール輸送層13)(40nm): $\alpha-NP$ 

有機層2(発光層12)(30nm): CBP: 所定の 金属配位化合物(重量比8重量%)

有機層3(励起子拡散防止層17)(10nm)BCP 有機層4(電子輸送層16)(30nm):Alq3 金属電極層1(15nm): AlLi合金(Li含有量

1.8重量%)

金属電極層2(100nm):A1

【0067】配位化合物としては、No.1、No.3 4、No. 113およびNo. 140の化合物を用い た。

【0068】EL素子の特性は、電流電圧特性をヒュー レッドパッカード社製・微小電流計4140日で測定 し、発光輝度は、トプコン社製BM7で測定した。本実 施例の各配位化合物に対応する素子はそれぞれ良好な整 流性を示した。

【0069】電圧12V印加時に、本EL素子からの発 光を確認した。発光はそれぞれ、

実施例5(化合物No.1)の素子:1000cd/m

実施例6(化合物No.34)の素子:950cd/m

実施例7(化合物No.113)の素子:900cd/

実施例8(化合物No. 140)の素子:900cd/  $m^2$ 

であった。

【0070】これらの配位化合物の発光特性を知るため に、溶液の発光スペクトルを測定した。分光蛍光光度計 (日立製:F4500)を用い、配位化合物のトルエン 溶液に350nm前後の励起光を当てて発光スペクトル を測定した。発光スペクトルは、ほぼ電圧印加時のEL 素子のスペクトルの値と合致し、EL素子の発光が配位 化合物からの発光であることが確認された。

【0071】また、これらの素子に電圧を印加すると安 定した効率の高い発光が得られ、100時間連続して通 30 電しても安定した発光が得られた。

【0072】<実施例9>次の手順で図2に示す単純マ トリクス型有機EL素子を作成した。

【0073】縦75mm、横75mm、厚さ1.1mm のガラス基板21上に透明電極22 (陽極側)として約 100 nm厚のITO膜をスパッタ法にて形成後、単純 マトリクス電極としてLINE/SPACE=100  $\mu$ m/40µmの間隔で100ラインをパターニングし た。次に実施例5と同じ有機材料を用いて、同様の条件 で4層からなる有機化合物層23を作成した。

【0074】続いて、マスク蒸着にて、LINE/SP

 $ACE = 100 \mu m / 40 \mu m$ で50ラインの金属電極 をITO電極22に直交するように真空度2.7×10 -3 Pa (2×10-5 Torr) の条件下で真空蒸着法に て成膜した。金属電極(陰極24)はA1-Li合金 (Li:1.3wt%)を膜厚10nm、つづいてA1 -Li層上にAlを150nmで形成した。

28

【0075】この100×100の単純マトリクス型有 機EL素子を窒素雰囲気で満たしたグローブボックス中 にて図3のような10Vの走査信号、±4Vの情報信号 10 によって、6 Vから1 4 Vの間で、単純マトリクス駆動 をおこなった。フレーム周波数30Hzでインターレス 駆動したところ、滑らかな動画像が確認できた。

#### [0076]

【発明の効果】以上説明のように、前記一般式(1)で 示される金属配位化合物を発光中心材料に用いた本発明 の発光素子は、高効率発光のみならず、長い期間高輝度 を保ち、優れた素子である。また、本発明の発光素子は 表示素子としても優れている。

## 【図面の簡単な説明】

【図1】本発明の発光素子の一例を示す図である。

【図2】実施例9の単純マトリクス型有機EL素子を示 す図である。

【図3】実施例9の駆動信号を示す図である。

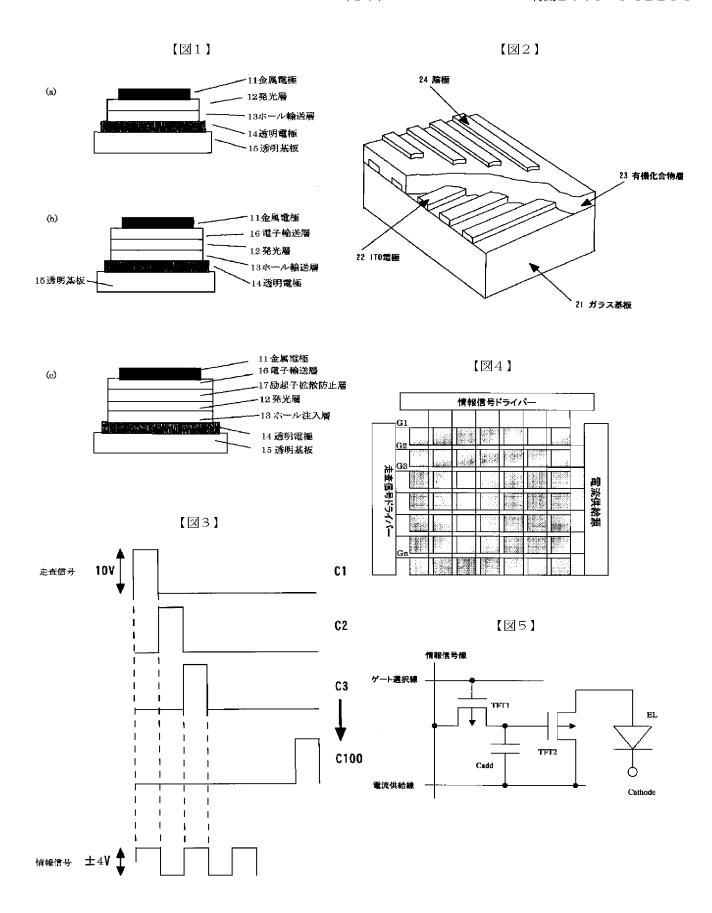
【図4】E L素子と駆動手段を備えたパネルの構成の一 例を模式的に示した図である。

【図5】画素回路の一例を示す図である。

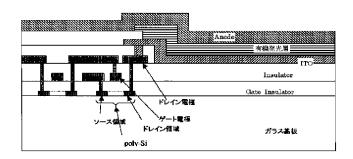
【図6】 TFT基板の断面構造の一例を示した模式図で ある。

# 【符号の説明】

- 11 金属電極
  - 12 発光層
  - 13 ホール輸送層
  - 14 透明電極
  - 15 透明基板
  - 16 電子輸送層
  - 17 励起子拡散防止層
  - 21 ガラス基板
  - 22 ITO電極(透明電極)
  - 23 有機化合物層
- 40 24陰極



## 【図6】



# フロントページの続き

(72)発明者 鎌谷 淳 東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キヤ ノン株式会社内

(72)発明者 岡田 伸二郎 東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キヤ ノン株式会社内

(72)発明者 坪山 明 東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キヤ ノン株式会社内 (72)発明者 三浦 聖志

東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キヤノン株式会社内

(72)発明者 森山 孝志

東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キヤノン株式会社内

(72)発明者 岩脇 洋伸

東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キヤノン株式会社内

Fターム(参考) 3K007 AB02 AB03 DB03 4H050 AA01 AA03 AB91 WB11 WB13 WB21 **DERWENT-ACC-NO:** 2004-242829

**DERWENT-WEEK:** 200423

COPYRIGHT 2009 DERWENT INFORMATION LTD

TITLE: New metal coordination compound

for use as luminescent material for light emitting element used

for display device

INVENTOR: IGAWA S; IWAWAKI H ; KAMATANI A ; MIURA

K ; MORIYAMA T ; OKADA S ; TAKIGUCHI

T ; TSUBOYAMA A

PATENT-ASSIGNEE: CANON KK[CANO]

**PRIORITY-DATA:** 2002JP-156586 (May 30, 2002)

PATENT-FAMILY:

PUB-NO PUB-DATE LANGUAGE

JP 2003342284 A December 3, 2003 JA

# APPLICATION-DATA:

PUB-NO	APPL-DESCRIPTOR	APPL-NO	APPL-
			DATE
JP2003342284A	N/A	2002JP-	May
		156586	30,
			2002

### INT-CL-CURRENT:

TYPE	IPC DATE	
CIPP	H01L51/50	20060101
CIPS	C07F15/00	20060101
CIPS	C09K11/06	20060101
CIPS	Н05В33/14	20060101

ABSTRACTED-PUB-NO: JP 2003342284 A

# BASIC-ABSTRACT:

NOVELTY - A metal coordination compound (I), is new.

DESCRIPTION - A metal coordination compound of formula MLmL'n (I) is new.

M = metal atom of iridium or platinum;

L, L' = different bidentate ligands;

m = 1, 2 or 3;

n = 0, 1 or 2;

m+n = 2 or 3;

partial structure MLm = formula (2); and

partial structure ML'n = formula (3) or (4).

N and C = nitrogen and carbon atoms;

X and X' = optionally substituted cyclic groups bonded to metal atom via nitrogen;

Y = optionally substituted cyclic group bonded to metal atom via carbon atom;

Z = optionally substituted cyclic group;

A = CR, N, B or SiR';

R and R' = H or optionally substituted aryl or 1-20C alkyl;

E = a bond or a linking group;

G, G' = optionally substituted alkyl or aryl; and

J = as G, or preferably hydrogen.

Adjoining substituents may form a ring. X and Y, and X and Z are groups bonded according to covalent bond via A atom or A atom group; and Y and Z are groups bonded according to covalent bond via E atom or E atom group.

INDEPENDENT CLAIMS are included for the following:

- (a) light emitting element having an organic compound layer containing the metal coordination compound; and
- (b) display device having a portion which drives the light emitting element, and the light emitting element.

USE - For light emitting element used for display device (claimed). As luminescent material.

ADVANTAGE - The light emitting element utilizing

the metal coordination compound, has high efficiency light-emission property and high intensity for long period of time.

DESCRIPTION OF DRAWING(S) - The figure shows the model of light emitting element. (Drawing includes non-English language text).

metal electrode (11)

light emitting layer (12)

hole carrying layer (13)

transparent electrode (14)

electron carrying layer (16)

# **EQUIVALENT-ABSTRACTS:**

ORGANIC CHEMISTRY

Preferred Layer: The light emitting element has the organic compound layer containing the metal coordination compound, provided to support by two opposing electrodes, and an electroluminescence element which emits light by applying voltage, between the electrodes.

Full Definition:

N and C = nitrogen and carbon atoms;

X and X' = optionally substituted cyclic groups bonded to metal via nitrogen;

Y = optionally substituted cyclic group bonded to

metal via carbon;

Z = Z';

Z' = cyclic group with optional substituent;

substituent of the cyclic groups = halogen, cyano, nitro, di-substituted amino (the substituent is phenyl group with optional substituent, naphthyl group (the substituent is halogen, methyl, trifluoro methyl or 1-8C linear or branched alkyl, where hydrogen atom in the alkyl group is optionally substituted by fluorine), or 1-8C linear or branched alkyl, where hydrogen atom in the alkyl group is optionally substituted by fluorine), 1-20C linear or branched alkyl (one or more of the non-adjacent methylene group in the alkyl group may be replaced by -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -O-CO-, -CH=CH-, or -Ctriple bond C-, where methylene group of one or more in the alkyl group may be replaced by bivalent aromatic ring group (the substituent is halogen, cyano, nitro or 1-20C linear or branched alkyl (one or more of the nonadjacent methylene group in the alkyl group may be replaced by -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -O-CO-, CH=CH-, -C triple bond C-, and the hydrogen atom in the alkyl group may be substituted by fluorine)) having an optional substituent, and the hydrogen atom in the alkyl group may be substituted by fluorine), or aryl group (the substituent is halogen, methyl, trifluoromethyl or 1-8C linear or branched alkyl, where hydrogen atom in the alkyl group is optionally substituted by fluorine) with optional substituent;

A = CR, N, B or SiR';

R and R' = W;

W = aryl group (the substituent is halogen,methyl, trifluoromethyl or 1-8C linear or branched alkyl, where hydrogen atom in the alkyl group is optionally substituted by fluorine) with optional hydrogen atom or substituent, or 1-20C linear or branched alkyl (one or more of the non-adjacent methylene group in the alkyl group may be replaced by -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -O-CO-, -CH=CH-, -C triple bond C-, and methylene group of 1 or more in the alkyl group may be replaced by bivalent aromatic ring group (the substituent is halogen, cyano, nitro or 1-20C linear or branched alkyl (one or more of the non-adjacent methylene group in the alkyl group may be replaced by -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -O-CO-, -CH=CH-, or -C triple bond C-, and the hydrogen atom in the alkyl group may be substituted by fluorine)) with optional substituent, and the hydrogen atom in the alkyl group may be substituted by fluorine);

E = Q;

Q = single bond, 1-4C linear or branched alkylene group (one methylene group in the alkylene group may be replaced by -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -O-CO-, -CH=CH-, -C triple bond C-, where the hydrogen atom in the alkylene group may be substituted by fluorine);

G, G' = group S;

J = group S, preferably hydrogen atom; and

S = 1-20C linear or branched alkyl group (one or more non-adjacent methylene group in the alkyl

group may be replaced by -0-, -S-, -CO-, -CO-0-, -O-CO-, -CH=CH-, or -C triple bond C-, where the methylene group of one or more in the alkyl group may be replaced by bivalent aromatic ring group (the substituent is halogen, cyano, nitro, trialkyl silyl (the alkyl group is 1-8C linear or branched alkyl), or 1-20C linear or branched alkyl (one or more of the non-adjacent methylene group in the alkyl group may be replaced by -O-, -S-, -CO-, -CO-O-, -O-CO-, -CH=CH- or, -C triple bond C-, where the hydrogen atom in the alkyl group may be substituted by fluorine), where the adjoining substituent may form a ring system) having optional substituent, and the hydrogen atom in the alkyl group may be substituted by fluorine), disubstituted amino (the substituent is phenyl with optional substituent, naphthyl, (the substituent is halogen, methyl or trifluoromethyl), or 1-8C linear or branched alkyl, where the hydrogen atom in the alkyl group may be substituted by fluorine), or aryl (the substituent is halogen, methyl, trifluoromethyl or 1-8C linear or branched alkyl, where hydrogen atom in the alkyl group may be substituted by fluorine) with optional substituent.

The adjoining substituent may form a ring system. X and Y, and X and Z are groups bonded according to covalent bond via A atom or A atom group. Y and Z are groups bonded according to covalent bond via E atom or E atom group.

Preferred Definitions:

n = 0; and

partial structure MLm = formula (2) chosen from

formulae (5-9).

Bis(2-(9H-carbazole-9-yl)-pyridine-C1,N) (acetyl acetonate) iridium (III) (in g) (0.399), glycerol (25 ml) and 2-(9H-carbazole-9-yl)-pyridine (0.31), were mixed in a flask. The mixture was heatstirred for 8 hours at 180 degreesC under nitrogen stream. The reaction material was cooled to room temperature, and poured into 150 ml of water. The resulting deposit was filtered, water washed, and dried under reduced pressure at 100 degreesC for 5 hours. The deposit was purified by silica gel column chromatography, and tris(2-(9H-carbazole-9-yl)-pyridine-C1,N)iridium (III) powder (0.20) was obtained with 44% yield.

**CHOSEN-DRAWING:** Dwg.1/6

TITLE-TERMS: NEW METAL COORDINATE COMPOUND

LUMINESCENT MATERIAL LIGHT EMIT

ELEMENT DISPLAY DEVICE

DERWENT-CLASS: E12 E23 L03 U11

**CPI-CODES:** E24-A04C; E24-A05; L03-D01D; L03-

G05F;

**EPI-CODES:** U11-A15B;

CHEMICAL-CODES: Chemical Indexing M4 \*01\* Fragmentation Code A677 A923 D011 D019 D021 D029 E100 E199 F012 F019 F431 F499 H1 H123 H2 H203 L943 L999 M1 M124 M129 M144 M280 M320 M411 M513 M523 M530 M540 M710 Q454 Q613 W002 W030 W334 W335 Specific Compounds RADOGX Registry Numbers 873724

> Chemical Indexing M4 \*02\* Fragmentation Code A677 A923 F012 F019 F431 F499 G020 G029 G031 G038 G039 G310 G399 M1 M116 M119 M124 M129 M144 M210 M211 M240 M283 M320 M411 M510 M523 M533 M540 M710 Q454 Q613 W002 W030 W334 W335 Specific Compounds RADOH2 Registry Numbers 873729

> Chemical Indexing M4 \*03\* Fragmentation Code A677 A923 A960 D011 D019 D021 D029 E100 E199 F012 F019 F431 F499 H122 H202 J582 L943 L999 M124 M144 M210 M211 M262 M280 M282 M311 M320 M321 M342 M382 M391 M411 M510 M512 M520 M522 M530 M540 M620 M630 M650 M710 Q454 Q613 W002 W030 W334 W335 Specific Compounds RADOH4 Registry Numbers 873731

> Chemical Indexing M4 \*04\* Fragmentation Code A677 A923 A960 F012 F019 F431 F499 G020 G029 G031 G038 G039 G310 G399 J582 M116 M119 M124 M144 M210 M211

```
M240 M262 M282 M311 M320 M321
M342 M382 M391 M411 M510 M520
M522 M530 M532 M540 M620 M630
M650 M710 Q454 Q613 W002 W030
W334 W335 Specific Compounds
RADOH7 Registry Numbers 873734
```

Chemical Indexing M4 \*05\* Fragmentation Code A678 A923 A960 B605 B614 B720 B741 B742 B743 B744 B760 B803 B831 B832 B834 B840 D010 D011 D013 D016 D019 D020 D021 D022 D023 D024 D025 D029 D040 D049 D210 D220 D299 D410 D499 E100 E112 E130 E160 E199 E510 E520 E599 E800 E899 F010 F012 F013 F014 F015 F016 F019 F020 F021 F029 F431 F499 G001 G002 G010 G011 G012 G013 G019 G020 G021 G022 G023 G024 G029 G031 G035 G038 G039 G040 G100 G111 G112 G113 G221 G299 G310 G332 G360 G370 G399 H103 H121 H122 H123 H141 H142 H143 H201 H202 H321 H322 H323 H341 H342 H343 H541 H542 H543 H581 H582 H583 H584 H589 H598 H599 H600 H601 H608 H609 H621 H622 H623 H641 H642 H643 H681 H682 H683 H685 H689 H715 H721 H722 H723 H731 J011 J012 J013 J014 J271 J272 J273 J521 J522 J561 J562 J581 J582 J583 L142 L143 L199 L942 L943 L999 M1 M112 M113 M114 M115 M116 M119 M121 M122 M123 M124 M125 M126 M129 M143 M144 M149 M210 M211 M212 M213

```
M214 M215 M216 M220 M221 M222
M223 M224 M225 M226 M231 M232
M233 M240 M250 M262 M271 M272
M273 M280 M281 M282 M283 M311
M312 M313 M314 M315 M316 M320
M321 M322 M323 M331 M332 M333
M340 M342 M344 M353 M362 M372
M373 M391 M392 M393 M411 M510
M511 M512 M513 M520 M521 M522
M530 M531 M532 M533 M540 M710
Q454 Q613 W002 W030 W334 W335
Ring Index Numbers 03067 03688
03697 08569 08572 08666 10437
12482 12751 12763 40435 53709
53718 55581 69297 73601 Markush
Compounds 012638801
```

Chemical Indexing M4 \*06\* Fragmentation Code A678 A910 A960 B605 B614 B720 B741 B743 B744 B760 B803 B831 B840 D010 D011 D013 D016 D019 D020 D021 D022 D023 D024 D025 D029 D040 D049 D210 D220 D410 E100 E112 E130 E160 E510 E520 E800 F012 F013 F014 F015 F016 F020 F021 F431 G001 G002 G010 G011 G012 G013 G019 G020 G021 G022 G023 G024 G029 G031 G035 G038 G040 G100 G111 G112 G113 G221 G299 G310 G332 G360 G370 H103 H121 H122 H123 H141 H142 H143 H181 H201 H321 H322 H323 H341 H342 H343 H541 H542 H581 H582 H583 H584 Н589 Н598 Н599 Н601 Н608 Н609 H621 H622 H623 H641 H642 H643 H681 H682 H683 H685 H689 H714

```
H715 H721 H722 H723 H731 J011
J012 J013 J014 J111 J271 J272
J273 J341 J342 J371 J372 J521
J561 J581 J582 J583 L142 L143
L199 L942 L943 M112 M113 M114
M115 M116 M119 M121 M122 M123
M124 M125 M129 M135 M139 M143
M144 M149 M210 M211 M212 M213
M214 M215 M216 M220 M221 M222
M223 M224 M225 M226 M231 M232
M233 M240 M250 M262 M271 M272
M273 M280 M281 M282 M283 M311
M312 M313 M314 M315 M316 M320
M321 M322 M323 M331 M332 M333
M340 M342 M343 M344 M349 M353
M362 M372 M373 M381 M382 M391
M392 M393 M411 M510 M511 M512
M520 M521 M530 M531 M532 M533
M540 M620 M630 M650 M710 O454
Q613 W002 W030 W334 W335 Ring
Index Numbers 03067 03688 03697
08569 08572 08666 10437 12482
12751 12763 40435 53709 53718
55581 69297 73601 Markush
Compounds 012638802
```

Chemical Indexing M4 \*07\*
Fragmentation Code A677 A923 A960
B605 B614 B720 B741 B742 B743
B744 B760 B803 B831 B832 B833
B834 B840 D010 D011 D013 D016
D019 D020 D021 D022 D023 D024
D025 D029 D040 D049 D210 D220
D299 D410 D499 E100 E112 E130
E160 E199 E510 E520 E599 E800
E899 F010 F012 F013 F014 F015
F019 F020 F021 F029 F431 F499

```
G001 G002 G010 G011 G012 G013
G019 G020 G021 G022 G023 G024
G029 G031 G035 G038 G039 G040
G100 G111 G112 G113 G221 G299
G310 G332 G360 G370 G399 H103
H121 H122 H123 H141 H142 H143
H201 H202 H203 H321 H322 H323
H341 H342 H343 H541 H542 H543
H581 H582 H583 H584 H589 H598
H599 H600 H601 H608 H609 H621
H622 H623 H641 H642 H643 H681
H682 H683 H685 H689 H715 H721
H722 H723 H731 J011 J012 J013
J014 J271 J272 J273 J521 J522
J523 J561 J562 J563 J581 J582
J583 L142 L143 L199 L942 L943
L999 M1 M112 M113 M114 M115 M116
M119 M121 M122 M123 M124 M125
M126 M129 M143 M144 M149 M210
M211 M212 M213 M214 M215 M216
M220 M221 M222 M223 M224 M225
M226 M231 M232 M233 M240 M250
M262 M271 M272 M273 M280 M281
M282 M283 M311 M312 M313 M314
M315 M316 M320 M321 M322 M323
M331 M332 M333 M340 M342 M344
M353 M362 M372 M373 M391 M392
M393 M411 M510 M511 M512 M513
M520 M521 M522 M523 M530 M531
M532 M533 M540 M710 O454 O613
W002 W030 W334 W335 Ring Index
Numbers 03067 03688 03697 08569
08572 08666 10437 12482 12751
12763 40435 53709 53718 55581
69297 73601 Markush Compounds
012638803
```

Chemical Indexing M4 \*08\* Fragmentation Code A677 A923 A960 B605 B614 B720 B741 B742 B743 B744 B760 B803 B831 B832 B834 B840 D010 D011 D013 D016 D019 D020 D021 D022 D023 D024 D025 D029 D040 D049 D210 D220 D299 D410 D499 E100 E112 E130 E160 E199 E510 E520 E599 E800 E899 F012 F013 F014 F015 F019 F020 F021 F029 F431 F499 G001 G002 G010 G011 G012 G013 G019 G020 G021 G022 G023 G024 G029 G031 G035 G038 G039 G040 G100 G111 G112 G113 G221 G299 G310 G332 G360 G370 G399 H103 H121 H122 H123 H141 H142 H143 H181 H201 H202 H321 H322 H323 H341 H342 H343 H541 H542 H543 H581 H582 H583 H584 H589 H598 H599 H601 H608 H609 H621 H622 H623 H641 H642 H643 H681 H682 H683 H685 H689 H714 H715 H721 H722 H723 H731 J011 J012 J013 J014 J111 J271 J272 J273 J341 J342 J371 J372 J521 J522 J561 J562 J581 J582 J583 L142 L143 L199 L942 L943 L999 M112 M113 M114 M115 M116 M119 M121 M122 M123 M124 M125 M126 M129 M135 M139 M143 M144 M149 M210 M211 M212 M213 M214 M215 M216 M220 M221 M222 M223 M224 M225 M226 M231 M232 M233 M240 M250 M262 M271 M272 M273 M280 M281 M282 M283 M311 M312 M313 M314 M315 M316 M320 M321 M322 M323 M331 M332 M333 M340 M342 M343 M344 M349 M353

M362 M372 M373 M381 M382 M391
M392 M393 M411 M510 M511 M512
M513 M520 M521 M522 M530 M531
M532 M533 M540 M620 M630 M650
M710 Q454 Q613 W002 W030 W334
W335 Ring Index Numbers 03067
03688 03697 08569 08572 08666
10437 12482 12751 12763 40435
53709 53718 55581 69297 73601
Markush Compounds 012638804

Chemical Indexing M4 \*09\* Fragmentation Code A677 A910 A960 B605 B614 B720 B741 B743 B744 B760 B803 B831 B840 D010 D011 D013 D016 D019 D020 D021 D022 D023 D024 D025 D029 D040 D049 D210 D220 D410 E100 E112 E130 E160 E510 E520 E800 F012 F013 F014 F015 F020 F021 F431 G001 G002 G010 G011 G012 G013 G019 G020 G021 G022 G023 G024 G029 G031 G035 G038 G040 G100 G111 G112 G113 G221 G299 G310 G332 G360 G370 H103 H121 H122 H123 H141 H142 H143 H181 H201 H321 H322 H323 H341 H342 H343 H541 H542 H581 H582 H583 H584 H589 H598 H599 H601 H608 H609 H621 H622 H623 H641 H642 H643 H681 H682 H683 H685 H689 H714 H715 H721 H722 H723 H731 J011 J012 J013 J014 J111 J271 J272 J273 J341 J342 J371 J372 J521 J561 J581 J582 J583 L142 L143 L199 L942 L943 M112 M113 M114 M115 M116 M119 M121 M122 M123 M124

M125 M129 M135 M139 M143 M144 M149 M210 M211 M212 M213 M214 M215 M216 M220 M221 M222 M223 M224 M225 M226 M231 M232 M233 M240 M250 M262 M271 M272 M273 M280 M281 M282 M283 M311 M312 M313 M314 M315 M316 M320 M321 M322 M323 M331 M332 M333 M340 M342 M343 M344 M349 M353 M362 M372 M373 M381 M382 M391 M392 M393 M411 M510 M511 M512 M520 M521 M530 M531 M532 M533 M540 M620 M630 M650 M710 Q454 Q613 W002 W030 W334 W335 Ring Index Numbers 03067 03688 03697 08569 08572 08666 10437 12482 12751 12763 40435 53709 53718 55581 69297 73601 Markush Compounds 012638805

## SECONDARY-ACC-NO:

CPI Secondary Accession Numbers: 2004-095418

Non-CPI Secondary Accession Numbers: 2004-192526